

## OR-1

**РАСШИРЕННЫЕ ИНТЕРАКТИВНЫЕ ТАБЛИЦЫ РЕАКЦИОННОЙ СПОСОБНОСТИ ГРИН: ПОДБОР ОПТИМАЛЬНЫХ УСЛОВИЙ ПРОВЕДЕНИЯ РЕАКЦИЙ В СЛУЧАЕ СЕЛЕКТИВНОГО СНЯТИЯ ЗАЩИТНЫХ ГРУПП**

**В. А. Афонина<sup>1</sup>, Р. И. Нугманов<sup>1</sup>, А. И. Лин<sup>1</sup>, С. И. Мусаева<sup>1</sup>, О. Климчук<sup>2</sup>,  
Т. И. Маджидов<sup>1</sup>, И. С. Антипин<sup>1</sup>, А. Варнек<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>*Химический институт им. А.М. Бутлерова, Казанский (Приволжский) федеральный университет, Россия, 420008, г. Казань, ул. Кремлёвская, 18;*

<sup>2</sup>*Университет Страсбурга, 67081, Франция, г. Страсбург, ул. Блеза Паскаля, 4.  
E-mail: ValAAfonina@kpfu.ru*

Планирование многостадийного синтеза сложных органических соединений часто приводит к вовлечению в него молекул с несколькими реакционными центрами, что, в свою очередь, диктует необходимость решения задачи селективного проведения реакций. Одним из способов решения данной проблемы является применение избирательной блокады требуемых функциональных групп с помощью защитных групп. Несмотря на огромное количество информации о реакциях, доступной в различных химических базах данных (такая известная химическая база данных, как Reaxys, на настоящий момент включает 53,8 млн реакций), реакционная способность защитных групп применительно к конкретной реакции обычно оценивается либо на основании собственного опыта, либо с помощью литературных источников, содержащих некоторую компиляцию интересующей информации. Хорошим примером таковых является книга *Greene's Protective Groups in Organic Synthesis*, пережившая уже пять переизданий. Тем не менее такой подход имеет значительные недостатки. Во-первых, квинтэссенция знаний, содержащихся в таких источниках (в частности, в таблицах реакционной способности из вышеуказанной книги), получена за счет ручного анализа, что подводит к мысли о том, что выводы были сделаны на основании изучения сравнительно небольшого набора реакций. При этом следует учесть тот факт, что авторами приводится только часть ссылок на использованные статьи. Во-вторых, выводы о реакционной способности защитных групп в определенных условиях указываются в виде категории – защитная группа может быть высоко-, средне- или низко реакционноспособна либо с ней могут происходить нецелевые превращения. Третьим недостатком является то, что не учитывается влияние окружения защитных групп. Современные методы, используемые в хемоинформатике, позволяют устранить все вышеописанные недостатки. Разработанная нами система анализа больших реакционных данных условий протекания реакций (с веб-интерфейсом) позволяет полностью автоматически определять присутствие защитных групп в реакции, оценивать, что именно с ними в данном случае происходит (за счет использования подходов «конденсированного графа реакций» и подструктурного поиска), какие условия использовались (кодируются с помощью сочетания «стандартизированных» условий и тегов), и в итоге формировать автоматически обновляемые при поступлении новых данных таблицы реакционной способности защитных групп, схожие по структуре с таковыми у Грин. Несомненным достоинством таких таблиц является возможность оценить реакционную способность в численном виде (процент случаев снятия или нецелевой трансформации) вместе с полным набором ссылок на соответствующие реакции (в химической базе данных Reaxys). Условия, приведенные в данных таблицах, включают не только приведенные в *Greene's Protective Groups in Organic Synthesis*, но и другие часто встречающиеся в использованном наборе одностадийных реакций каталитического гидрирования условия.